

機関番号：12401

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2007～2010

課題番号：19560058

研究課題名（和文）実対称固有値問題に対する多分割の分割統治法の発展と応用

研究課題名（英文）Development and Application of Multiple Division Divide-and-Conquer Algorithm for Real Symmetric Eigenproblem

研究代表者

重原 孝臣 (SHIGEHARA TAKAOMI)

埼玉大学・大学院理工学研究科・教授

研究者番号：60206084

研究成果の概要（和文）：

数値線形代数は種々の科学技術分野での大規模数値シミュレーションにおいて重要な役割を果たす。理由は、シミュレーションプログラムのコアプロセスはしばしば連立1次方程式や固有値問題や特異値分解などの行列演算で構成されるからである。この研究では、最近我々のグループによって提案された実対称固有値問題に対する多分割の分割統治法を改良・発展させるためのいくつかの提案を行った。応用として、特異値分解に対する多分割の分割統治法を確立した。さらに、正方行列に対するジョルダン標準形および行列束に対するクロネッカ標準形を計算するための新しい有効なアルゴリズムの提案を行った。

研究成果の概要（英文）：

Numerical linear algebra plays an important role in a large scale numerical simulation in various scientific and technological fields. It is because the core process of the simulation programs are often composed of matrix computations such as linear equation, eigenproblem and singular value decomposition. In this research, we proposed some methods to improve the multiple division divide-and-conquer algorithm for real symmetric eigenproblem, which has been recently proposed by our group. As an application, we established the multiple division divide-and-conquer algorithm for singular value decomposition. Furthermore, we proposed new efficient algorithms to compute Jordan canonical form for square matrices and Kronecker canonical form for matrix pencils.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2007年度	1,100,000	330,000	1,430,000
2008年度	600,000	180,000	780,000
2009年度	600,000	180,000	780,000
2010年度	500,000	150,000	650,000
年度			
総計	2,800,000	840,000	3,640,000

研究分野：数値線形代数

科研費の分科・細目：応用物理学・工学基礎 ・ 工学基礎

キーワード：数理工学、アルゴリズム、実対称固有値問題、特異値分解、分割統治法、
ジョルダン標準形、クロネッカ標準形、並列化

1. 研究開始当初の背景

自然科学や社会科学に係る様々な分野で数値シミュレーションに係る需要が増大してきている。固有値問題、特異値分解や種々の標準形に係る行列計算は、シミュレーションプログラムのコアを成すことが多く、高速化・高精度化に係る研究が重要である。

実対称固有値問題に対する多分割の分割統治法は我々のグループによって提案された最新の実対称固有値問題解法アルゴリズムの一つである。基盤的研究については既にいくつかの成果を挙げているが、アルゴリズム中で指定するパラメータの自動決定の方法や並列化手法について更に検討を進める必要がある。また、有用な応用として、特異値分解への適用が考えられる。

正方行列に対するジョルダン標準形や行列束に対するクロネッカ標準形の数値計算法については、これまでに、標準形自体の計算については実用的なレベルに達しているアルゴリズムが存在するが、基底の計算については十分な研究がなされていない状況である。クロネッカ基底の構成は、最も一般的な型の固有値問題に対する完全解を与えることに通じ、応用上も重要である。

2. 研究の目的

(1)分割統治法の発展・拡張

①最適分割数の自動決定

実対称固有値問題に対する多分割の分割統治法では、入力行列に応じて最適な分割数が異なる。そこで、準最適な分割数を、入力行列に対する簡単な事前ベンチマークを通じて自動決定する方法を検討する。

②特異値分解への応用

実対称固有値問題に対する多分割の分割統治法を特異値分解へ応用する方法を確立し、有効性を検証する。

③並列化

分割統治法は元来並列性が高く、並列計算機の性能を十分に引き出せることが期待される。そこで、まず共有並列化、次に分散並列化の効果的な方法を確立し、有効性を検証する。

(2)特異な一般固有値問題への適用

①数学的枠組・アルゴリズムの確立

特異な一般固有値問題を取り扱うための数学的な枠組・アルゴリズムを確立し、提案アルゴリズムを実装して、その有効性を検証する。

②クロネッカ基底の構成法の確立と応用

任意の行列束に対してクロネッカ基底が存在することを構成的方法で証明し、証明の手順に則って、クロネッカ基底を数値計算する手法を開発する。

③ジョルダン基底の構成法の確立

クロネッカ基底は、特別な場合として、ジョルダン基底を含む。そこで前項の考察を応用して、ジョルダン基底を数値計算する手法を開発する。

3. 研究の方法

研究対象の数理的構造を調べる。必要に応じて、アルゴリズム化が可能なように対象を構成的な方法で再構築する。それらに基づき、問題を計算機で解くためのアルゴリズムを設計する。作成したアルゴリズムをまず最新のPCに実装し、演算量や数値精度を評価する。プログラムをチューニング後、従来手法との比較検討を行う。アルゴリズムの並列手法を検討し、最新のスーパーコンピュータに実装して、大規模問題に対する有用性を確認する。

4. 研究成果

(1)分割統治法の発展・拡張

①最適分割数の自動決定

入力行列の減次発生率と最適分割数には密接な関係があることを示し、入力行列の減次発生率を簡単なベンチマークで調べることで、最適分割数を推定できることを示した。研究成果は5. [図書] ①の論文で公表した。

②特異値分解への応用

多分割の分割統治法による特異値分解は、同じ分割数の分割統治法による実対称固有値問題に帰着できることを示し、アルゴリズムの構築、実装、有効性の検証を行った。

研究成果は5. [雑誌論文] ②の論文で公表した。

③並列化

共有並列、分散並列ともに、主として東京大学のスーパーコンピュータ SR11000 を用いて並列化手法の検討を行い、実装、有効性の検証を行った。

研究成果は5. [雑誌論文] ③ (分散並列) および⑤ (共有並列) の論文で公表した。

④課題と今後の展望

種々のテスト行列に対して、本研究での提案手法は他の代表的手法を上回る性能を示しているが、一部の悪条件の行列に対して性能劣化が生じている。原因は、固有ベクトルの精度が不十分な場合に事後処理として固有ベクトルの再直交化を行っているため、今後、演算量を実質的に増加させずに、再直交化のプロセスなしに固有ベクトルを高精度で計算できるアルゴリズムの導入が必要になる。現在、この目的の実現のために複数のアイデアを持っており、今後検討を継続していきたい。この問題が解決できれば、提案アルゴリズムは、現在世界標準とされている他のアルゴリズムと同等ないしはそれらを凌ぐ汎用的アルゴリズムに成長するものと考えている。

(2)特異な一般固有値問題への適用

①数学的枠組・アルゴリズムの確立

以下の②の応用として、特異な一般固有値問題を取り扱う新たな数学的枠組・アルゴリズムの確立に成功した。

②クロネッカ基底の構成法の確立と応用

クロネッカ基底の存在に関して新たな構成的証明を与え、証明法に基づき、クロネッカ基底を数値計算するためのアルゴリズムを確立し、有効性を数値実験で検証した。

数値計算に係る研究成果は5. [雑誌論文] ④の論文で公表した。

③ジョルダン基底の構成法の確立

ジョルダン基底の存在に関する極めて短い構成的証明を与え、これに基づき、ジョルダン基底を数値計算するためのアルゴリズムを確立し、有効性を数値実験で検証した。

研究成果は5. [雑誌論文] ①の論文で公表した。

④課題と今後の展望

今回の研究で、提案アルゴリズムが十分に機能することが確認され、研究の基盤的部分は確立できたものと考えている。今後、前処理の導入による演算量の削減、高精度化、既存手法との比較、並列化手法の確立、実用的な問題への応用などの課題が残っている。幸い、本研究テーマに対して、平成23年度よ

り5年計画で基盤研究(C)が採択されたので、この期間にこれらの課題に順次取り組んでいきたいと考えている。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計5件)

①Kenji Kudo, Yoshiaki Kakinuma, Kazuyuki Hiraoka, Hiroki Hashiguchi, Yutaka Kuwajima, Takaomi Shigehara, 'Algorithm for Computing Jordan Basis', JSIAM Letters, Vol. 2, pp. 119-122, 2010, 査読有

②Yutaka Kuwajima, Youichiro Shimizu, Takaomi Shigehara, 'Proposal and Efficient Implementation of Multiple Division Divide-and-Conquer Algorithm for SVD', JSIAM Letters, Vol. 2, pp. 91-94, 2010, 査読有

③田村純一、坪谷怜、桑島豊、重原孝臣、「実対称固有値問題に対する多分割の分割統治法の分散並列アルゴリズムの提案」、ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム HPCS2010, pp. 35-42, 2010, 査読有、および、情報処理学会論文誌、コンピューティングシステム、Vol. 3, No. 2, pp. 20-29, 2010, 査読有

④Yoshiaki Kakinuma, Kazuyuki Hiraoka, Hiroki Hashiguchi, Yutaka Kuwajima, Takaomi Shigehara, 'Algorithm for Computing Kronecker Basis', JSIAM Letters, Vol. 1, pp. 60-63, 2009, 査読有

⑤田村純一、坪谷怜、桑島豊、重原孝臣、「実対称固有値問題に対する多分割の分割統治法の共有メモリ型並列計算機における有効性」、ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム HPCS2009, pp. 97-104, 2009, 査読有

[学会発表] (計16件)

①松本拓也、「ブロックシューア標準形のジョルダン基底計算アルゴリズムの提案」、日本応用数学会 2011 年研究部会連合発表会、2011 年 3 月 7 日、電気通信大学 (東京)

②石川祐輔、「特異値分解に対する多分割の分割統治法における減次率と最適分割数の関係」、日本応用数学会 2010 年度年会、2010 年 9 月 6 日、明治大学駿河台キャンパス

③田村純一、「実対称固有値問題に対する多

分割の分割統治法の分散並列アルゴリズムの提案」、ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム HPCS2010、2010年1月14日、工学院大学（東京）

④工藤健司、「ジョルダン基底計算アルゴリズムの計算精度」、日本応用数学会 2009 年度年会、2009年9月30日、大阪大学豊中キャンパス

⑤石川祐輔、「実対称固有値問題に対する多分割の分割統治法における最適分割数の推定について」、日本応用数学会 2009 年度年会、2009年9月29日、大阪大学豊中キャンパス

⑥清水陽一郎、「特異値分解に対する多分割の分割統治法の提案」、日本応用数学会 2009 年度年会、2009年9月29日、大阪大学豊中キャンパス

⑦工藤健司、「ジョルダン基底計算アルゴリズムの提案」、第38回数値解析シンポジウム、2009年6月15日、熱川ハイツ（静岡）

⑧石川祐輔、「実対称固有値問題に対する多分割の分割統治法における準最適分割数の自動決定について」、第38回数値解析シンポジウム、2009年6月15日、熱川ハイツ（静岡）

⑨田村純一、「実対称固有値問題に対する多分割の分割統治法の共有メモリ型並列計算機における有効性」、ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム HPCS2009、2009年1月23日、東京大学武田ホール

⑩柿沼芳昭、「クロネッカ基底計算アルゴリズムの計算精度について」、日本応用数学会 2008 年度年会、2008年9月19日、東京大学柏キャンパス

⑪富永将数、「ブロック三重対角化と分割統治法を組み合わせた実対称固有値問題解法アルゴリズムの提案」、第37回数値解析シンポジウム、2008年6月12日、たざわこ芸術村（秋田）

⑫坪谷怜、「実対称固有値問題に対する多分割の分割統治法の並列計算機における有用性」、第37回数値解析シンポジウム、2008年6月12日、たざわこ芸術村（秋田）

⑬柿沼芳昭、「クロネッカ基底計算アルゴリズムの実装」、第37回数値解析シンポジウム、2008年6月12日、たざわこ芸術村（秋田）

⑭平岡和幸、「クロネッカ基底の存在に関する構成的証明」、日本応用数学会 2007 年度年会、2007年9月15日、北海道大学

⑮古岡佑也、「特異な一般固有値問題に対する新たな解法の提案」、日本応用数学会 2007 年度年会、2007年9月15日、北海道大学

⑯桑島豊、「低階数摂動を伴う実対称固有値問題の安定な解法について」、日本応用数学会 2007 年度年会、2007年9月15日、北海道大学

〔図書〕（計1件）

①Yusuke Ishikawa, Junichi Tamura, Yutaka Kuwajima, Takaomi Shigehara, 'Automatic Tuning of the Division Number in the Multiple Division Divide-and-Conquer for Real Symmetric Eigenproblem', Software Automatic Tuning: From Concepts to the State-of-the-Art Results, pp.87-101, Springer, 2010, 査読有

〔その他〕

ホームページ等

<http://www.nc.ics.saitama-u.ac.jp/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

重原 孝臣 (SHIGEHARA TAKAOMI)

埼玉大学・大学院理工学研究科・教授

研究者番号：60206084

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

なし

(4) 研究協力者

平岡 和幸 (HIRAOKA KAZUYUKI)

和歌山工業高等専門学校・一般科目・

准教授

研究者番号：00312918

橋口 博樹 (HASHIGUCHI HIROKI)

埼玉大学・大学院理工学研究科・准教授

研究者番号：50266920

桑島 豊 (KUWAJIMA YUTAKA)

埼玉大学・大学院理工学研究科・助教

研究者番号：40451736